

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ  
ИМПЛАНТИРОВАННЫХ В КРИСТАЛЛ АТОМОВ ЗА ГРАНИЦЕЙ ПРОБЕГА

В. И. Сугаков

*Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев*

Выполнено численное моделирование диффузионного движения внедренных в кристалл атомов и точечных дефектов, созданных облучением, в пространстве за областью пробега. Определяющую роль играют процессы рекомбинации внедряемых атомов с термодинамически равновесными вакансиями. Показано, что в пространстве за областью пробега (запробежной областью) возникает сильно обедненная вакансиями область, в конце которой имеет место пик вероятности процессов рекомбинации, а также плотности комплексов вакансий с внедренными атомами. Размеры области растут с увеличением плотности потока внедряемых атомов, понижением температуры и степени дефектности кристалла, могут намного превышать длину пробега и достигать несколько десятков микрон. Анализируются возможные проявления эффекта, в частности, для объяснения эффекта «дальнодействия».

*Ключевые слова:* ионное облучение, дефекты, тепловые вакансии, диффузия, дальнодействие.

**Введение**

Уже несколько десятилетий в радиационной физике наблюдается специфическое явление, которое называется термином «дальнодействие» [1 - 7]. Явление состоит в том, что за пределами области кристалла, в которую проникают падающие на кристалл ионы, наблюдаются изменения физических свойств кристалла: увеличение микротвердости [5], появление фазовых переходов [5, 7], возникновение дефектов на расстояниях, значительно превышающих величину пробега ионов [1] и др. (см. обзоры [3, 4, 7]). Для объяснения явления привлекались модели ускоренной диффузии в поле механических напряжений, возникающих при облучении [2], модели солитонов [6], а также подчеркивалась важность процессов самоорганизации [5]. Однако хотя многие из рассмотренных механизмов влияют на процессы далекого проникновения ионов в кристалл, они не объясняют явление в комплексе.

В настоящей работе анализируются решения уравнений радиационной физики в виде уравнений химической кинетики с акцентом на некоторые обстоятельства, не учитываемые в предыдущих работах. В работе показано, что при облучении кристалла пучком ионов в кристалле на значительном расстоянии от области пробега ионов возникает пик плотности внедряемых ионов, а между пиком и областью конца пробега во время облучения существуют специфические распределения точечных дефектов, которые могут привести к изменению свойств этой области. Предполагается, ориентация кристалла такова, что процессы каналирования несущественны.

**Модель системы. Основные уравнения**

Модель, используемая в работе, основана на следующих факторах:

1) важную роль в формировании свойств в запробежной области играют термодинамически равновесные вакансии;

2) общее число атомов в междоузельном положении (собственных и внедряемых) превышает число вакансий;

3) внедряемые атомы разделяются на неподвижные, захваченные вакансиями, и атомы в междоузельном положении, диффундирующие вглубь кристалла.

Внедряемые атомы, двигаясь в кристалле, быстро теряют энергию и приходят в равновесие с решеткой. В кристалле происходят процессы создания дефектов, процессы рекомбинации и образования кластеров. Будем характеризовать систему плотностью точечных дефектов, выживших после быстрых релаксационных процессов, а именно плотностью внедряемых в кристалл атомов в междоузельном положении  $n_p$ , плотностью вакансий  $n_v$ , плотностью междоузельных атомов облучаемого вещества  $n_i$ . Плотности вакансий и междоузельных атомов включают в себе как плотности дефектов, созданных облучением, так и термодинамически равновесные значения. Концентрация термодинамически равновесных междоузлий мала, и мы будем ею пренебрегать. Поэтому величина  $n_i$  совпадает с плотностью междоузлий созданных облучением. Вследствие процессов рекомбинации внедряемого атома в междоузельном положении с вакансией будет образовываться комплекс: вакансия – междоузельный атом. Концентрацию комплексов будем обозначать через  $n_k$ . В кристалле происходят процессы захвата и излучения вакансий и междоузельных атомов стоками. В отсутствие облучения конкуренция этих двух процессов приводит к термодинамически

равновесному значению вакансий  $n_v = n_v^{th}$  и междоузлий  $n_i = n_i^{th} \approx 0$ . Поскольку комплексы вакансий с внедряемыми атомами в междоузельном положении являются центрами замещения, их подвижность мала и мы будем их рассматривать неподвижными [9]. При однородном в пространстве облучении поверхности кристалла плотности квазичастиц зависят от времени и расстояния от поверхности  $z$ :  $n \equiv n(z, t)$ .

Основная система уравнений имеет вид

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = K_v(z) + D_v \frac{\partial^2 n_v}{\partial z^2} - W_{vi} n_i n_v - W_{vp} (n_p n_v - v_{pv}^k n_k) - W_{vd} (n_v - n_v^{th}), \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = K_i(z) + D_i \frac{\partial^2 n_i}{\partial z^2} - W_{vi} n_i n_v - W_{id} n_i, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = K_p(z) + D_p \frac{\partial^2 n_p}{\partial z^2} - W_{vp} (n_p n_v - v_{pv}^k n_k) - W_{pd} n_p, \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = W_{vp} (n_p n_v - v_{pv}^k n_k), \quad (4)$$

где  $n_v, n_i, n_v^{th}, n_p, n_k$  - плотности вакансий, междоузельных атомов, термодинамически равновесных вакансий, внедряемых ионов в междоузельном положении и комплексов соответственно;  $K_v(z), K_i(z), K_p(z)$  - скорости создания в единицу времени и единице объема вакансий, междоузельных атомов и внедряемых атомов в междоузельном положении соответственно;  $D_v, D_i, D_p$  - коэффициенты диффузии вакансий, междоузельных атомов и атомов внедрения соответственно;  $W_{v(i,p)d}$  - вероятность захвата вакансии (междоузельного атома, внедряемого иона) стоком;  $W_{vi(p)}$  - скорость рекомбинации междоузельных атомов (атомов внедрения) и вакансий; в результате рекомбинации атома внедрения с вакансией образуется комплекс, а при рекомбинации междоузельного собственного атома с вакансией исчезают оба дефекта;  $v_{vp}^k = W_k^d / W_{vp}$ ,  $W_k^d$  - вероятность распада комплекса на вакансию и внедряемый атом в междоузельном положении. Согласно принципу детального равновесия  $v_{vp}^k \approx \exp(-E_k / \kappa T)$ , где  $E_k$  - энергия образования комплекса.

Для расчетов выберем коэффициенты в кинетических уравнениях в виде типично используемых в радиационной физике [8]. Для коэффици-

ента рекомбинации вакансии и внедряемого атома используем формулу

$$W_{pv} = 4\pi R_{pv} (D_p + D_v) / v_o, \quad (5)$$

где  $R_{pv}$  - радиус области рекомбинации;  $v_o$  - объем элементарной ячейки;  $D_{v(p)} = D_{ov(op)} \text{Exp}(-E_{v(p)} / \kappa T)$ .

В качестве стоков рассмотрим дислокации, которые могут захватывать внедряемые атомы и вакансии. В простейшей популярной модели вероятности захвата внедренного атома (вакансии) определяются формулой

$$W_{p(v)d} = 2\pi r_o D_{p(v)} / \ln \frac{R_{p(v)d}}{r_{p(v)d}}, \quad (6)$$

где  $r_o$  - плотность дислокаций;  $R_{p(v)d}$  - радиус внешнего цилиндра, охватывающего объем, с которого внедряемые атомы (вакансии) приходят к дислокации, находящейся на оси цилиндра;  $r_{p(v)d}$  - эффективный радиус захвата атомов (вакансий). Плотность равновесных вакансий определяем формулой  $n_v^{th} = v_o^{-1} \exp(-E_Q / \kappa T)$ . Учет разнообразных комплексов, захватывающих вакансии и атомы в междоузельных положениях, усложняет задачу, однако не меняет выводы.

В дальнейшем система уравнений (1) - (4) решалась численно для различных частных случаев. При расчетах за единицу длины выбирался период решетки  $a$ . При этом в дальнейшем плотности квазичастиц и потоков будут задаваться и приводиться на рисунках в относительных единицах  $n_{p(v)} \rightarrow n_{p(v)} v_o$ ,  $I_o \rightarrow I_o a^2$ , в этом случае плотность является безразмерной величиной, а плотность потока имеет размерность обратного времени (1/с). Главное внимание уделялось выяснению структуры распределения вакансий и внедряемых атомов в пространстве и ее изменению во времени в зависимости от плотности облучаемого потока, температуры, плотности стоков. При этом для всех расчетов приведем результаты для одних и тех же значений некоторых параметров кристалла. Так, будем полагать:  $a = 3 \cdot 10^{-8}$  см,  $D_{0v} = D_{0p} = 0,1$  см<sup>2</sup>/с,  $E_v = 1,2$  эВ,  $E_p = 0,05$  эВ,  $E_Q = 0,9$  эВ,  $R_{pv} = 3 \cdot a$ ,  $R_{pd} = R_{vd} = \sqrt{r_o}$ ,  $R_{pd} = R_{vd} = a$ .

### Расчеты без учета генерации дефектов при внедрении атомов в кристалл

Пусть энергия внедряемых атомов мала настолько, что плотностью создаваемых точечных

дефектов можно пренебречь. В частности, такая ситуация возникает, когда кристалл находится в атмосфере газа, атомы которого хорошо растворяются в кристалле или энергия внедряемых атомов меньше пороговой. Закономерности, полученные для данного случая, смогут реализоваться в более общем случае, когда внедряемые атомы создадут дефекты в кристалле. В рассматриваемом случае в системе уравнений (1) - (4) следует положить  $K_v(z) = K_i(z) = 0, n_i = 0$ . При этом уравнение (2) удовлетворяется автоматически, а внешнее воздействие на систему определяется скоростью введения атомов внешним источником в единицу времени в единице объема  $K_p(z)$ . При облучении ионами с малой энергией внедряемые ионы сконцентрированы вблизи поверхности, в области порядка 0,01 мкм. Область кристалла, в которой останавливаются атомы после внедрения, является малой по сравнению с областью, которая формируется диффузией. Тогда при решении системы (1) - (4) скорость введения атомов может быть аппроксимирована соотношением

$$K_p(z) = I_o \delta(z), \quad (7)$$

где величина  $I_o$  пропорциональна числу внедряемых атомов, вводимых в кристалл в междоузельное положение в единицу времени на единицу поверхности  $I_{in} \cdot (I_o = \alpha I_{in}, \alpha < 1)$ . Часть внедряемых атомов движется вглубь кристалла диффузионным образом, другая часть остается в области пробега, образуя различного вида сложные дефекты в этой области. Поскольку относительные доли атомов, диффундирующих внутрь и остающихся в области пробега, зависят от дефектной структуры в области пробега и связи внедряемых атомов с атомами этой области, величина  $I_o$  может зависеть от температуры. Считаем величину  $I_o$  параметром не зависящим от времени.

В случае отсутствия генерации точечных дефектов в системе уравнений (1) - (4) следует положить  $K_v(z) = K_i(z) = 0, n_i = 0$ . Источником вакансий в рассматриваемом случае является приток тепловых вакансий из глубины кристалла, от поверхности и от дефектов решетки. Учитывая соотношение (7), плотность вводимых в кристалл атомов  $K_p(z)$  можно опустить в уравнениях и учесть внедрение атомов введением граничных условий.

При условии, что облучение включается в момент времени  $t = 0$ , начальные условия к системе уравнений (1) - (4) имеют вид

$$n_p(z, t) = 0, n_v(z, t) = n_{vs}^{th}(z) \text{ при } t = 0, \quad (8)$$

а граничные условия равны

$$n_v(0, t) = n_{vsurf}^{th}, \quad \left. \frac{\partial n_p}{\partial z} \right|_{z=0} = -\frac{I_o}{D_p} \text{ при } z = 0, \quad (9)$$

$$n_v(z, t) \rightarrow n_v^{th}, \quad n_p(z, t) \rightarrow 0 \text{ при } z \rightarrow \infty, \quad (10)$$

где  $n_{vs}$  - зависимость от  $z$  плотности вакансий у поверхности при отсутствии облучения  $n_{vs} = n_v^{th} + (n_{vsurf}^{th} - n_v^{th}) \exp(-z/l_d)$ ;  $n_{vsurf}^{th}$  - равновесная плотность вакансий у поверхности. Ее значение определяется балансом двух процессов: ухода вакансий на поверхность и ухода междоузельного атома на поверхность с рождением вакансии. Если поверхность является идеальным стоком для вакансий, то  $n_{vsurf}^{th} = 0$ . Если поверхностные и объемные стоки согласованы, тогда  $n_{vsurf}^{th} = n_v^{th}$ .

После включения облучения внедряемые атомы распространяются вглубь кристалла, по пути они захватываются стоками и вакансиями, образуя комплексы: вакансии – междоузельный атом. Расчеты показывают (рис. 1), что в запробуженной части пространства возникает область, состоящая из внедренных атомов и их комплексов с вакансиями, плотность вакансий в этой области ничтожно мала. С увеличением времени эта область растет. Постепенно по мере продвижения вглубь кристалла плотность внедряемых атомов падает вследствие захвата на стоки и тепловые вакансии с образованием комплексов, и в дальнейшем их продвижение прекращается. В системе при стационарном облучении устанавливается некоторое состояние, в котором распределение плотности вакансий и внедряемых атомов не зависит от времени, а плотность комплексов имеет резкий, растущий со временем, максимум (пик) на определенном расстоянии от поверхности. При больших расстояниях от пика плотность вакансий выходит на равновесное значение  $n_v^{th}$ . Время, требуемое для установления квазиравновесного состояния, резко увеличивается при понижении температуры. Нарушение такого квазистационарного состояния при очень больших временах, когда начинает проявляться взаимодействие между комплексами, а также начинает меняться структура стоков под облучением, в данной работе не исследуется.

Обозначим расстояние от поверхности до пика через  $L_F$ . Пик расположен на расстоянии от поверхности, на котором значительно падает

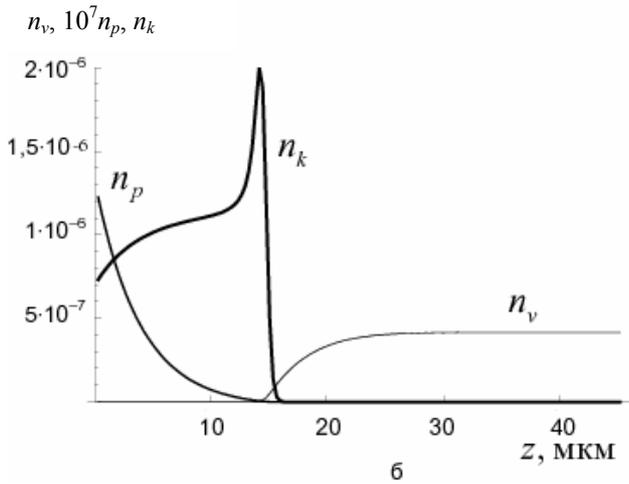
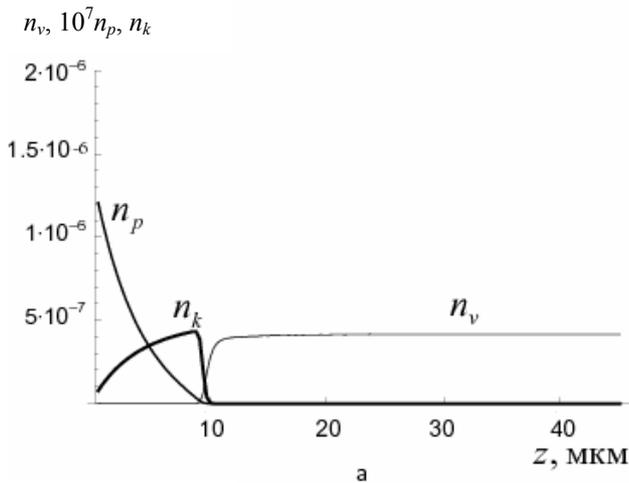


Рис. 1. Зависимость плотности внедряемых атомов, вакансий, комплексов при  $I_o = 0,001$ ,  $\rho = 10^7 \text{ см}^{-2}$ ,  $T = 700 \text{ К}$  от расстояния от поверхности для различных моментов времени: а - 50 с; б - 800 с.

плотность внедряемых атомов, и, начиная с которого, начинает расти плотность вакансий (см. рис. 1). В этой области вероятность рекомбинации вакансии и внедряемого атома, которая пропорциональна произведению плотностей  $n_v n_p$ , максимальна. В области пика существуют такие градиенты плотностей, что диффузионные потоки вакансий и внедряемых атомов ( $j_{v(p)} = -D_{v(p)} \vec{\nabla} n_{v(p)}$ ) направлены с разных сторон в направлении положения пика, что увеличивает рекомбинацию квазичастиц в этой области и образование комплексов. Отметим, что пик вероятности рекомбинации вакансий и внедряемых атомов в междоузельном положении существует в различные моменты времени. Его положение и высота зависят от времени (рис. 2).

Начиная с некоторого момента времени, положение пика становится фиксированным. Это видно, например, из совпадения кривых 4 и 5 на рис. 2, полученных для разных моментов времени. После установления квазистационарного со-

стояния происходит накопление комплексов в области пика (см. рис. 3). В то же время плотность вакансий на расстояниях меньших  $L_F$  (между поверхностью и пиком) ничтожно мала. Так, например, при параметрах системы, указанных на предыдущих рисунках, на расстоянии  $z = 10 \text{ мкм}$  плотность вакансий равна  $6,4 \cdot 10^{-11}$ , в то же время равновесная концентрация в рассматриваемой модели при  $T = 700 \text{ К}$  равна  $4,5 \cdot 10^{-7}$ , т.е. плотность равновесных вакансий подавляется на четыре порядка.

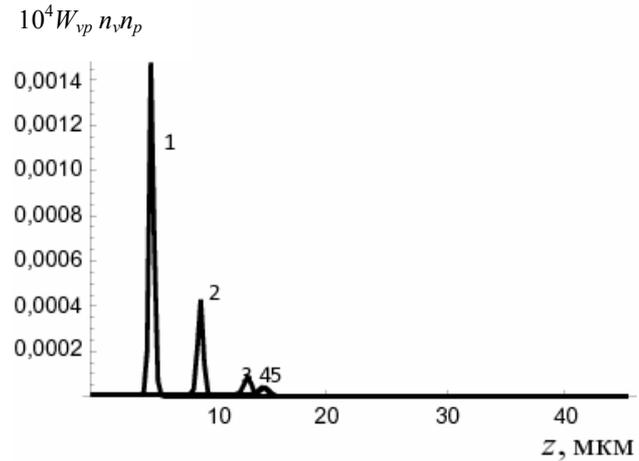


Рис. 2. Зависимость скорости образования комплексов внедряемых атомов с вакансиями при  $I_o = 0,001$ ,  $\rho = 10^7 \text{ см}^{-2}$ ,  $T = 700 \text{ К}$  от расстояния от поверхности для различных моментов времени: 1 - 10 с; 2 - 50 с; 3 - 250 с; 4 - 800 с; 5 - 10000 с.

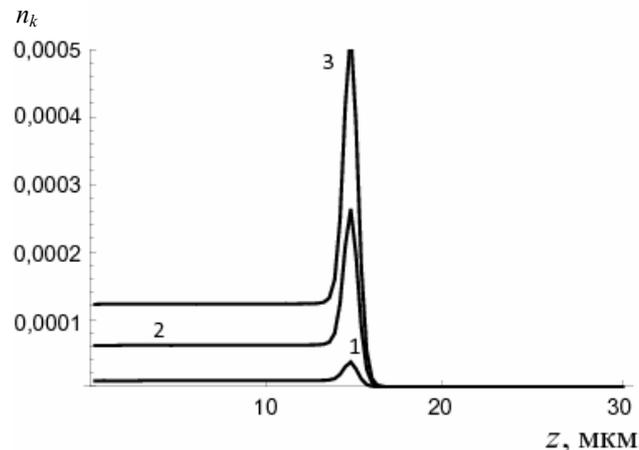


Рис. 3. Зависимость распределения в пространстве комплексов “внедренный атом - вакансия” в различные моменты времени: 1 -  $1 \cdot 10^4 \text{ с}$ ; 2 -  $7 \cdot 10^4 \text{ с}$ ; 3 -  $1,4 \cdot 10^5 \text{ с}$ . Параметры системы:  $I_o = 0,001$ ,  $\rho = 10^7 \text{ см}^{-2}$ ,  $T = 700 \text{ К}$ .

Оценим время, за которое внедряемый атом рекомбинирует с вакансией и время захвата внедряемого атома на дефект. Согласно формулам (3), (5) время захвата внедряемого атома ваканси-

ей оценивается формулой  $\tau_{vp}^{th} = (W_{vp} n_v)^{-1}$ , а время захвата стоком равно  $\tau_{dp} = (W_{dp})^{-1}$ . При выбранных параметрах для случая, когда плотность вакансий равна равновесной, т.е.  $n_v = n_v^{th}$ , получим  $\tau_{vp}^{th} = 1,3 \cdot 10^{-9}$  с,  $\tau_{dp} = 3,3 \cdot 10^{-6}$  с. Поэтому захват внедряемого атома на вакансию происходит намного быстрее, чем на сток. Однако в области  $0 < z < L_F$  происходит вымораживание вакансий. Поэтому  $n_v \ll n_v^{th}$  и время жизни внедряемого атома значительно увеличивается, что позволяет атому пройти большой путь в кристалле, чем в системе с равновесными вакансиями.

Таким образом, учет тепловых вакансий при введении ионов в кристалл может привести к двум эффектам: появлению максимума плотности внедряемых ионов в глубине кристалла и возникновению области с очень низкой концентрацией вакансий. В дальнейшем мы приведем результаты расчетов для квазистационарного случая, когда распределение плотностей вакансий и внедряемых атомов постоянны, а концентрация комплексов мала.

Из рис. 4 и 5 следует, что при увеличении плотности потока внедряемых атомов положение максимума скорости рекомбинации  $R_{vp} = W_{vp} n_v n_p$  смещается в сторону больших  $z$ , а из рис. 6 и 7 следует, что с увеличением плотности дефектов максимум смещается в сторону малых  $z$ . При малых плотностях дислокаций пик в распределении комплексов может быть расположен далеко от поверхности, но его высота становится малой.

$$n_v, 10^6 n_p, 10^2 R_{vp}$$

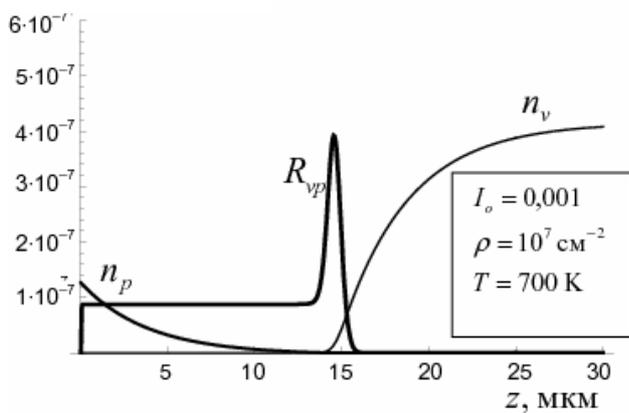


Рис. 4. Зависимость плотности вакансий, внедряемых атомов и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $n_v(0) = 0$ .

Расчеты показывают, что пик удаляется от поверхности с понижением температуры, при этом его интенсивность падает. Однако трудность интерпретации температурной зависимо-

сти обусловлена тем, что  $I_o$  также зависит от температуры.

$$n_v, 10^5 n_p, 10^2 R_{vp}$$

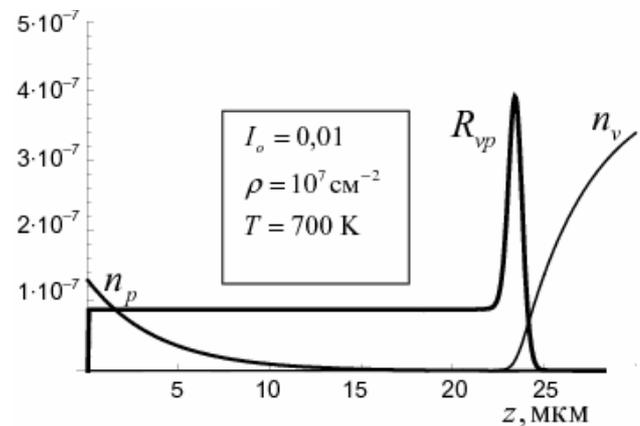


Рис. 5. Зависимость плотности вакансий, внедряемых атомов и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $n_v(0) = 0$ .

$$n_v, 10^5 n_p, 10^2 R_{vp}$$

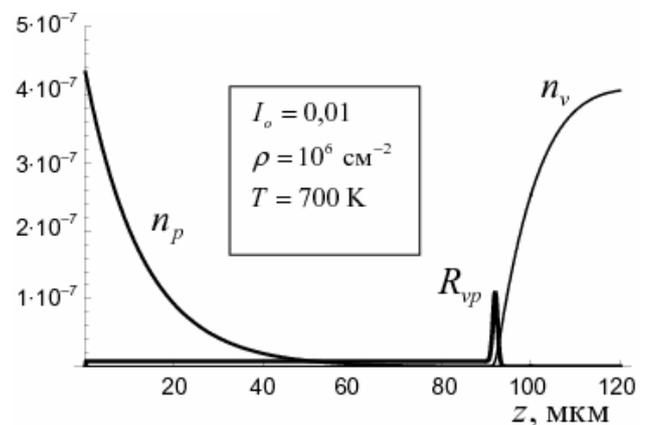


Рис. 6. Зависимость плотности вакансий, внедряемых атомов и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $n_v(0) = 0$ .

$$n_v, 10^6 n_p, 10 R_{vp}$$

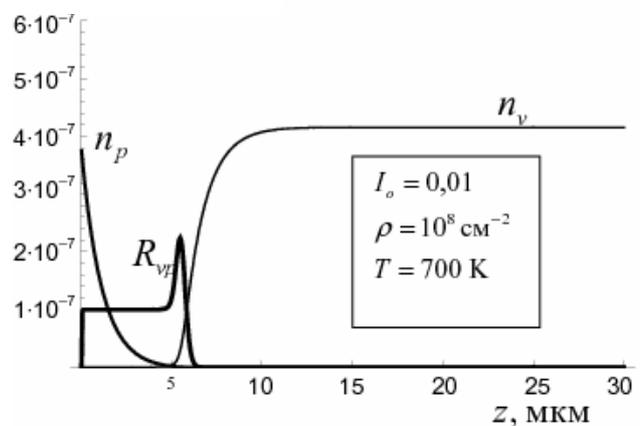


Рис. 7. Зависимость плотности вакансий, внедряемых атомов и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $n_v(0) = 0$ .

При других граничных условиях на поверхности с неравной нулю плотностью вакансий на поверхности (см. рис. 6 и 8) появляются процессы рекомбинации внедряемых атомов с вакансиями у поверхности, происходит небольшое уменьшение пика рекомбинации и небольшое смещение пика в сторону меньших  $z$ .

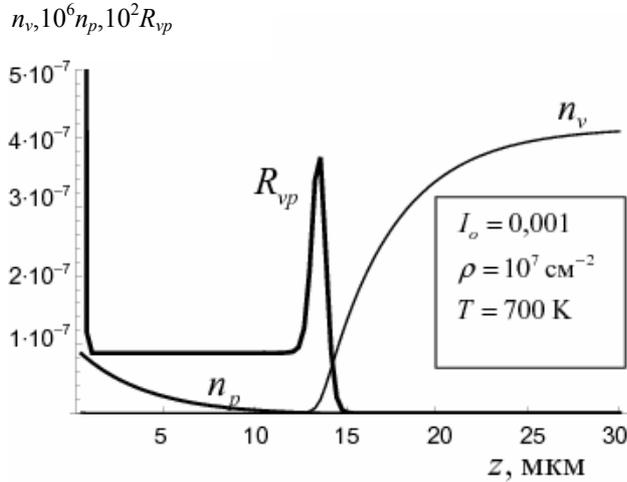


Рис. 8. Зависимость плотности вакансий, внедряемых атомов и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $n_v(0) = n_v^{th}$ .

**Учет создания точечных дефектов при облучении**

В данном параграфе мы рассмотрим задачу с учетом конкретного вида созданного облучением профиля внедренных атомов, а также учтем возникновение точечных дефектов (вакансий и междоузельных атомов) при облучении. Будем изучать эффекты облучения ионами высокой энергии, у которых профиль внедрения находится в глубине кристалла в конце пробега, распределение внедренных атомов будем аппроксимировать гауссовой функцией

$$K_0(z) = I_0 \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{l} \exp \left( -\frac{z^2}{2l^2} \right), \quad (11)$$

где  $I_0$  - плотность потока внедряемых ионов, диффундирующих в кристалл;  $l = \overline{(z^2)^{1/2}}$  - ширина распределения области внедряемых атомов. Координата  $z$  отсчитывается от поверхности в случае низких энергий ионов облучения, в случае ионов высоких энергий в формуле (11) координата  $z$  отсчитывается от максимума распределения ионов внедрения.

Будем предполагать, что скорость создания квазичастиц (внедренных атомов, вакансий и междоузельных атомов) пропорциональна скорости введения внедренных атомов. По крайней

мере все три величины пропорциональны плотности падающего потока. Тогда

$$K_{i(v)}(z) = q_{i(v)} K_0(z), \quad (12)$$

Вероятности захвата междоузельных атомов стоками и рекомбинации с вакансиями будем выбирать в таком же виде, как и для внедряемых атомов по формулам (5), (6), полагая  $W_{vp} \rightarrow W_{iv}, W_{pd} \rightarrow W_{id}, D_p \rightarrow D_i$ . При численных расчетах будем полагать  $R_{vi} = 10 \cdot a, R_{id} = a, r_{id} = a$ .

В данном параграфе мы будем анализировать решения для времен, когда реализуется квазистационарные состояния, и в системе уравнений (1) - (4) будем полагать  $n_k = 0$ . Согласно формула (11) и (12) решение находилось при граничных условиях  $dn_p/dz = dn_i/dz = dn_v/dz = 0$ .

Наличие радиационно-индуцированных вакансий при малых  $z$  приводит к дополнительному созданию комплексов в этой области. Поэтому помимо максимума рассмотренного ранее, возникающего вследствие рекомбинации внедряемых атомов и тепловых вакансий и расположенного далеко от конца области пробега, появляется максимум при  $z = 0$  (рис. 9 и 10).

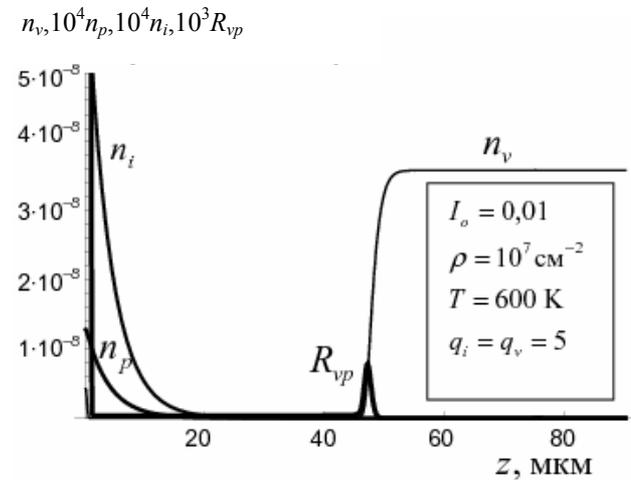


Рис. 9. Зависимость плотности вакансий, междоузлий, внедряемых атомов в междоузельном положении и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $l = 600 \cdot a$ .

Основные качественные закономерности поведения эффектов, полученных при учете генерации вакансий и междоузельных атомов при облучении ионами такие, как и без учета генерации: на расстояниях намного больших области пробега появляется пик в скорости и генерации комплексов вакансий с внедренными атомами, расстояние пика от области пробега увеличивается с ростом интенсивности облучения, умень-

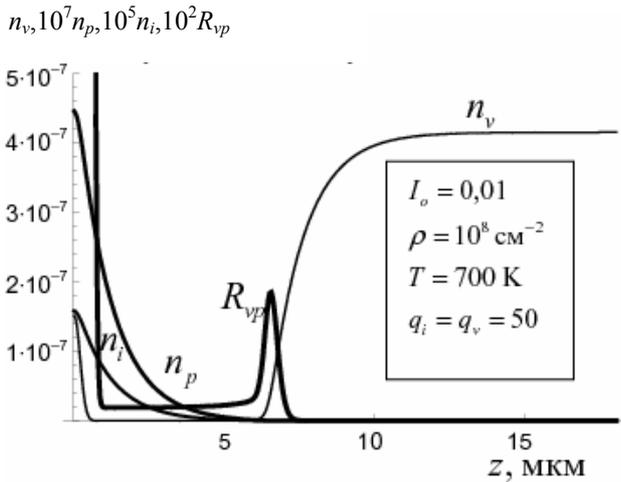


Рис. 10. Зависимость плотности вакансий, междоузлий, внедряемых атомов в междоузельном положении и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $l = 600 \cdot a$ .

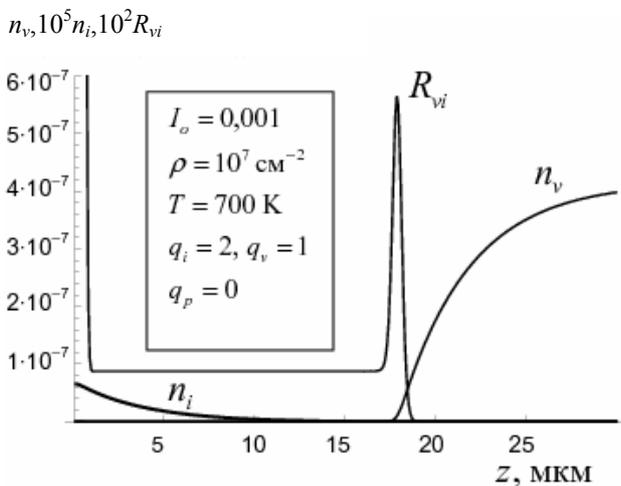


Рис. 11. Зависимость плотности вакансий, междоузлий и вероятности образования комплексов от расстояния от поверхности.  $l = 600 \cdot a$ .

шением числа дефектов и понижением температуры, если изменение температуры не изменяет поток атомов, диффундирующих в глубину кристалла. В пространстве между областью внедрения и пиком плотность вакансий ничтожно мала. Положение пика слабо зависит от количества вакансий и междоузлий, возникающих при внедрении, но его интенсивность падает с ростом этого количества (см. рис. 10).

Пик вероятности рекомбинации междоузельных атомов с вакансиями также имеет место

(рис. 11), когда внедренные атомы отсутствуют или в случае облучения собственными атомами кристалла, но число генерируемых вакансий меньше числа собственных атомов в междоузельном положении. В этом случае в области пика происходит интенсивная рекомбинация междоузельных атомов с вакансиями, которая не сопровождается появлением атомов внедрения. Однако процесс рекомбинации приводит к выделению энергии, что может привести к образованию дефектов в области пика, например вследствие процессов «радиационной тряски».

Отметим, что при решении аналогичной задачи авторы работ [10 - 12] не рассматривали случай избытка числа вводимых междоузельных атомов над числом вводимых вакансий. Поэтому далекого проникновения атомов в кристалл, вымораживания вакансий и появления пика в генерации комплексов в их расчетах не получилось.

### Обсуждение и выводы

В работе рассмотрено распространение внедряемых ионов в кристалле посредством диффузии за область пробега. Определяющую роль в формировании распределения плотности играют процессы рекомбинации внедряемых атомов с тепловыми вакансиями, а также избыток числа генерируемых атомов в междоузельном положении (собственных и внедряемых) над числом генерируемых вакансий. Распространяясь в кристалле, междоузельные атомы заполняют вакансии и захватываются различными стоками. Вследствие избытка междоузельных атомов плотность вакансий за областью пробега ничтожно мала, плотность комплексов растет, а плотность внедряемых атомов постепенно падает. На определенном расстоянии от области конца пробега ( $L_F$ ) имеется пик в вероятности рекомбинации внедряемых атомов и вакансий, что приводит к накоплению с течением времени комплексов в этой области. Положение пика  $L_F$  растет с ростом интенсивности падающего потока и уменьшением дефектности кристалла.

Наличие в процессе облучения между поверхностью и пиком обедненной вакансиями области должно привести к изменению протекания физических процессов (перестройке структуры вакансионных центров, образованию фаз и др.).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Павлов П.В., Пашкин В.И., Генкин В.М. и др. Изменение дислокационной структуры кремния при облучении ионами средних энергий // ФТТ. - 1973. - Т. 15, вып. 9. - С. 2857 - 2859.
2. Скупов В.Д., Тетельбаум Д.И., Шунгуров Г.В. Влияние протяженных дефектов в исходных кристаллах на эффект дальнего действия при ионной имплантации // Письма в ЖТФ. - 1989. - Т. 15, вып. 22. - С. 44 - 47.

3. Быков В.Н., Малышкин В.Г., Хмелевская В.С. Эффекты дальнего действия при ионном облучении // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 1989. - Вып. 3 (50). - С. 45 - 52.
4. Пивоваров А.Л. Эффект дальнего действия при облучении металлов ионно-плазменными потоками // Металлофизика и новейшие технологии. - 1994. - Т. 16, № 12. - С. 3 - 17.
5. Хмелевская В.С., Малышкин В.Г., Соловьев С.П. и др. Эффект дальнего действия в условиях радиационно-индуцированного кинетического фазового перехода // Письма в ЖТФ. - 1996. - Т. 22, вып. 5. - С. 9 - 13.
6. Гроза А.А., Литовченко П.Г., Старчик М.І. Ефекти радіації в інфрачервоному поглинанні та структурі кремнію. - К.: Наук. думка, 2006. - 124 с.
7. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // УФН. - 2008. - Т. 178, вып. 9. - С. 993 - 1001.
8. Зеленский В.Ф., Неклюдов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и набухание металлов. - К.: Наук. думка, 1988.
9. Zielinski F., Costantini J.M., Haussy J., Durbin F. Helium depth profiling after ion implantation and high-temperature annealing // J. Nucl. Mater. - 2003. - Vol. 312. - P. 141 - 145.
10. Yoo M.H., Mansur L.K. Distribution of point defects in bounded media under irradiation // Ibid. - 1976. - Vol. 62. - P. 282 - 292.
11. Ганн В.В., Волобуев А.В. Математическое моделирование процессов диффузии и отжига // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. - 1978. - вып. 2 (7). - С. 17 - 20.
12. Голіней І.Ю., Степкова В.В. Кінетика міграції первинних радіаційних дефектів при неоднорідному опроміненні // Ядерна фізика та енергетика. - 2009. - Т. 10, № 1. - С. 71 - 75.

### ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ РОЗПОДІЛУ ГУСТИНИ ІМПЛАНТОВАНИХ У КРИСТАЛ АТОМІВ ЗА МЕЖЕЮ ПРОБІГУ

В. Й. Сугаков

Проведено моделювання дифузійного руху імпантованих у кристалл атомів і точкових дефектів, створених опроміненням, за межею пробігу. Визначальну роль відіграють процеси рекомбінації прониклих атомів з термодинамічно рівноважними вакансіями. Показано, що в просторі за межею пробігу виникає сильно збіднена вакансіями область, на границі якої має місце пік імовірності процесів рекомбінації і густини комплексів вакансій з імпантованими атомами. Розміри області зростають зі збільшенням густини потоку атомів і дефектності кристала, вони можуть набагато перевищувати довжину пробігу іонів у кристалі й досягати кількох десятків мікрометрів.

*Ключові слова:* іонне опромінення, дефекти, теплові вакансії, дифузія, далекосяжна взаємодія.

### PECULIARITIES OF FORMATION OF IMPLANTED ATOM DENSITY DISTRIBUTION BEYOND ION RANGE

V. I. Sugakov

Modeling of diffusion processes of implanted atoms in crystal and point defects, created by irradiation, beyond ion range is fulfilled. The processes of recombination of implanted atoms with thermal vacancy play the key role. It is shown, that a region strong depleted by vacancies beyond the ion range arises. In the end of this region a spike of the probabilities of the recombination processes and also the spike of density of complexes of the vacancies with implanted atoms appear. The sizes of the region rise with increasing density of the flux of implanted ions and the number of defects in crystal. The sizes can significantly exceed the ion range and reach several tens of micrometers. Possible manifestations of effect are analyzed.

*Keywords:* ion irradiation, defects, thermal vacancy, diffusion, long-range interaction.

Поступила в редакцію 24.11.09,  
после доработки - 17.12.09.